

Université d'Oum El Baouaghi

Institut de Technologie

Département MPH

Niveau L₃ S₅

CONTROLE Technique Spectroscopique

Exercice 1: Questions de cours

1. Quelle transition électronique nécessite généralement la plus grande quantité d'énergie (longueur d'onde la plus courte) ?
2. Comment appelle-t-on le déplacement du maximum d'absorption vers des longueurs d'onde plus longues ?
3. Quel type d'électrons ne participe jamais aux transitions observées dans l'UV proche (200-400) nm?
4. Quelle transition est caractéristique du groupement carbonyle ($C=O$) vers 280 nm avec une faible intensité ?
5. Un 'auxochrome' est un groupement qui ?

Exercice 2

Une solution de permanganate de potassium $KMnO_4$ de concentration $C = 2,0 \cdot 10^{-4}$ mol/L est placée dans une cuve de 1cm.

Le coefficient d'extinction molaire à 525 nm est $\epsilon = 2350 \text{ Lmol}^{-1}\text{cm}^{-1}$.

Calculez l'absorbance A de cette solution appliquant la formule de beer-lambert.

Exercice 3

1 - Calculer la valeur de la constante de force pour la vibration d'elongation de la liaison C=O produisant une absorption à 1715cm^{-1} . Même question pour la vibration de la liaison simple C-O produisant une absorption à 1050cm^{-1}

2- commenter le résultat.

Exercice 4

le spectre infrarouge (IR) du 1-pentanol (dans la page suivante). Dans ce spectre, qu'est-ce que vous pouvez identifier comme bandes caractéristiques ?

Comment appelle-t-on la région du spectre située en dessous de 1500 cm^{-1} ?

Exercice 5

Spectre IR :

- Bande forte à 1735 cm^{-1}
- Bandes à $1050-1250 \text{ cm}^{-1}$

- Pas d'O-H

Questions :

1. Identifier la fonction principale
2. Justifier

Exercice 6

On enregistre le spectre de masse d'un composé organique inconnu (impact électronique).

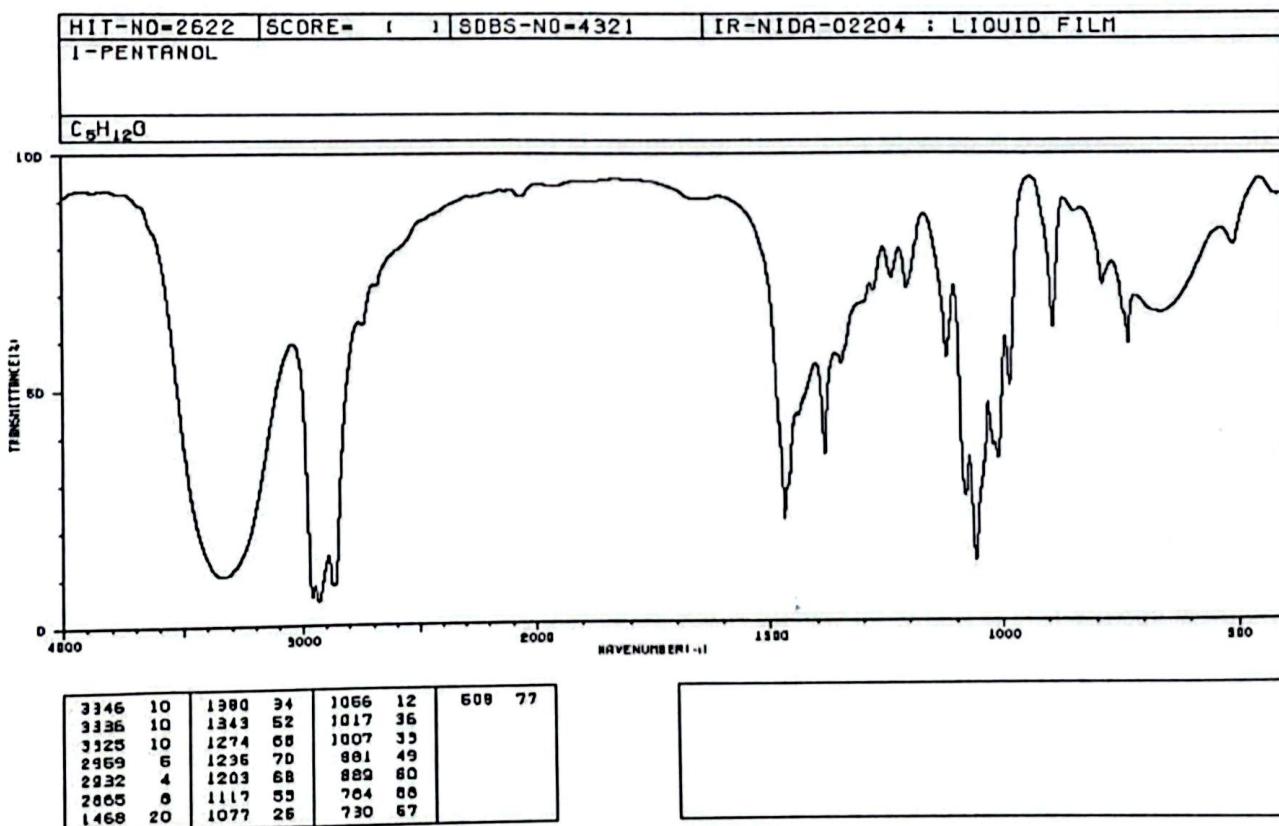
Données :

- Pic le plus intense : $m/z = 43$
- Pic à $m/z = 58$
- Pic à $m/z = 59$ (faible)

Questions :

1. Quel est le pic moléculaire ?
2. Quelle est la masse molaire du composé ?
3. À quoi correspond le pic $m/z = 43$?

Suite Exercice 4 : spectre pentanol



Bon Courage

Université d'Oum El Bouaghi

Institut des Sciences et Technologies Appliquées

Département MPH

Module : Spectroscopie moléculaire

Corrigé Type Examen Techniques Spectroscopiques

Exercice 1 : Questions de cours

- ① 1. La transition électronique nécessitant la plus grande énergie est la transition $\sigma \rightarrow \sigma^*$.
Elle correspond aux longueurs d'onde les plus courtes.
- ② 2. Le déplacement du maximum d'absorption vers des longueurs d'onde plus longues est appelé effet bathochrome (ou déplacement vers le rouge).
- ③ 3. Les électrons σ ne participent jamais aux transitions observées dans l'UV proche (200–400 nm), car ces transitions nécessitent une énergie trop élevée.
- ④ 4. La transition caractéristique du groupement carbonyle (C=O) vers 280 nm avec une faible intensité est la transition $n \rightarrow \pi^*$.
- ⑤ 5. Un auxochrome est un groupement fonctionnel qui, lorsqu'il est lié à un chromophore, modifie l'intensité et/ou la position des bandes d'absorption (souvent par effet bathochrome ou hyperchrome).

Exercice 2 : Loi de Beer-Lambert

La loi de Beer-Lambert s'écrit : $A = \epsilon \times l \times C$

Avec :

$$\epsilon = 2350 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$$

$$l = 1 \text{ cm}$$

$$C = 2,0 \times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$$

$$A = 2350 \times 1 \times 2,0 \times 10^{-4} = 0,47$$

L'absorbance de la solution est donc $A = 0,47$.

Exercice 3 : Spectroscopie infrarouge

C=O

On a $\bar{v}_{(C=O)} = 1715 \text{ cm}^{-1}$

On sait que : $\bar{v}_{(C=O)} = 4,12 \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

Alors: $k = \left(\frac{\bar{v}}{4,12}\right)^2 \times \mu$ et

$$\mu = \frac{M(C) \times M(O)}{M(C) + M(O)} = \frac{12 \times 16}{12 + 16} = 6,85 \text{ g/mol}$$

A.N: $k_{(C=O)} = \left(\frac{1715}{4,12}\right)^2 \times 6,85 = 1186928.03 \text{ dynes/cm}$

$$k_{(C=O)} \sim 11 \times 10^5 \text{ dynes/cm}$$

C-O

$k_{(C-O)} = \left(\frac{1050}{4,12}\right)^2 \times 6,85 = 444912.63 \text{ dynes/cm}$

$$k_{(C-O)} \sim 4.4 \times 10^5 \text{ dynes/cm}$$

①

Conclusion : la constante de force est d'autant plus grande que la liaison est rigide et multiple.

Exercice 4 : Analyse d'un spectre IR

Dans le spectre IR du 1-pentanol, on identifie :

- Une bande large entre 3200 et 3600 cm^{-1} attribuée à la vibration O-H (alcool).
- Des bandes entre 2850 et 2960 cm^{-1} correspondant aux vibrations C-H aliphatiques.
- Une bande intense vers 1050 cm^{-1} attribuée à la vibration C-O.

La région située en dessous de 1500 cm^{-1} est appelée la région d'empreinte digitale. ①

Exercice 5 : Identification fonctionnelle

1. La fonction chimique principale est un ester. ①

2. Justification :

- La bande forte à 1735 cm^{-1} est caractéristique de la vibration C=O d'un ester. ①
- Les bandes entre 1050 et 1250 cm^{-1} correspondent aux vibrations C-O. ①
- L'absence de bande O-H exclut les alcools et les acides carboxyliques. ①

Exercice 6 : Spectrométrie de masse

1. Le pic moléculaire correspond au pic à $m/z = 58$. ①

2. La masse molaire du composé est donc $M = 58 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$. ①

3. Le pic $m/z = 43$ correspond généralement à l'ion acylium CH_3CO^+ , fréquemment observé lors de la fragmentation des composés carbonylés. ①